

Динамика Химических Реакций в Условиях Бозе–Эйнштейновского Конденсата

Зинган А.П.

Приднестровский государственный университет
им. Т.Г. Шевченко
Тирасполь, Молдова
zingan.anna@mail.ru

Хаджи П.И.

Институт прикладной физики АНМ
Кишинев, Молдова

Abstract – The dynamic of coherent atomic-molecular conversion assisted by two Raman laser pulses is investigated in the frame of Gross-Pitaevskii equation. We have obtained the nonlinear equation for the production rate of heteronuclear molecules depending on the initial densities of particles and phase difference. It is shown that the conversion has the periodical and aperiodical regimes.

Index Terms – bose-condensate, Λ - scheme, heteronuclear molecule.

I. ВВЕДЕНИЕ

В связи с экспериментальным обнаружением бозе-эйнштейновской конденсации атомов и молекул при сверхнизких температурах в последнее время возник постоянно повышающийся интерес к новому, чрезвычайно перспективному, направлению исследований – к так называемой когерентной суперхимии. Особый интерес вызывает исследование динамики связанных атомно-молекулярных конденсатов в условиях проявления резонанса Фешбаха либо в условиях рамановской атомно-молекулярной конверсии с участием двух импульсов резонансного лазерного излучения. В настоящее время экспериментально получены новые, неизвестные до сих пор, молекулы, такие как Rb_2 , Li_2 , K_2 , Cs_2 , Cs_3 , Cs_4 , а также LiK , RbK , $LiKRb$ и др.

Явление бозе-эйнштейновской конденсации состоит в накоплении макроскопического числа частиц в нижайшем энергетическом состоянии. Это макроскопическое состояние может быть описано волновой функцией с определённой амплитудой и фазой. В классической химии такие состояния не рассматривались.

В условиях бозе-конденсата химическая реакция существенно стимулируется как компонентами, вступающими в реакцию, так и продуктами реакции. Такие реакции могут быть как периодическими во времени (обратимыми), так и аperiodическими (необратимыми). Коллективные осцилляции плотностей частиц, участвующих в реакции, свидетельствуют о существовании когерентности в системе, т.е. о протекании именно когерентной химической реакции. При этом бозе-стимулирование химической динамики (процессов связывания бозе-конденсированных атомов в молекулы и

распада последних) является чрезвычайно важным обстоятельством. Можно утверждать, что в недрах физики быстро протекающих когерентных процессов взаимодействие в макрозаполненной системе частиц возникает новая область науки – когерентная суперхимия, в которой имеет место когерентное стимулирование химических реакций. Стимулированная квантовая динамика может заменить обычную динамику при сверхнизких температурах, давая совершенно новый тип коллективного поведения системы. Атомно-молекулярные процессы в термодинамически равновесной системе не могут привести к подобным коллективным осцилляциям, так как фазы частиц являются случайными. Учёт сильной зависимости стимулированной химической кинетики от разности фаз свидетельствует о возможности установления фазовой суперхимической динамики, о возможности осуществления управления и контроля процесса протекания химической реакции только лишь изменением фаз при сохранении постоянным числа частиц, участвующих в реакции.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Изучим динамику процесса атомно-молекулярной конверсии под действием двух рамановских импульсов, который формально можно изобразить в виде реакции $a_1 + a_2 + c_1 \leftrightarrow b + c_2$, где символы a_1 и a_2 представляют два различных атома, например, ^{40}K и ^{87}Rb , c_1 и c_2 – фотоны с частотами ω_1 и ω_2 , а b – гетероядерную молекулу. Два различных свободных атома, находящиеся в бозе-конденсате с нулевыми кинетическими энергиями (нулевая температура) с полной энергией $E_i = \hbar(\omega_{i0} + \omega_{20})$, переходят в основное состояние гетероядерной молекулы с энергией $E_m = \hbar\Omega_0$ через возбужденное молекулярное состояние с энергией E_u , одновременно поглощая и излучая кванты света с энергиями $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$ соответственно (рис.1). При этом используются два коротких фазово-когерентных импульса с энергиями фотонов $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$ и определенными значениями амплитуд полей и фаз. Таким образом, пара атомов a_1 и a_2 , связываясь в гетероядерную молекулу b

(рис.1), приводит к переносу одного из фотонов первого импульса ко второму и наоборот.

Рассмотрим рамановскую атомно-молекулярную конверсию не как двухступенчатый процесс, а как единый (одноступенчатый) процесс. В этом случае можно предложить гамильтониан взаимодействия H_{int} , описывающий единый процесс индуцированной атомно-молекулярной конверсии под действием двух коротких импульсов резонансного лазерного излучения

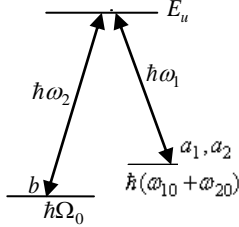


Рис.1. Схема переходов из атомного состояния в молекулярное.

$$H_{int} = \hbar g (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{b} \hat{c}_1^+ \hat{c}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{b}^+ \hat{c}_1 \hat{c}_2^+), \quad (2.1)$$

где $\hat{a}_{1,2}$ и \hat{b} - бозонные операторы уничтожения атомных и молекулярных состояний с собственными частотами ω_{01}, ω_{02} и Ω_0 соответственно, \hat{c}_1 и \hat{c}_2 - операторы уничтожения фотонов с частотами ω_1 и ω_2 , а g - константа взаимодействия. Вводя далее в рассмотрение две компоненты «поляризации»

$$Q = i(a_1 a_2 b^* c_1 c_2^* - a_1^* a_2^* b c_1^* c_2) \quad \text{и}$$

$R = a_1 a_2 b^* c_1 c_2^* + a_1^* a_2^* b c_1^* c_2$, получаем для них следующую систему нелинейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{N} &= \dot{f}_2 = -gQ, \\ \dot{Q} &= \Delta R + 2g(n_2 N f_1 f_2 + n_1 N f_1 f_2 - n_1 n_2 f_1 f_2 + n_1 n_2 N f_2 - n_1 n_2 N f_1), \\ \dot{R} &= -\Delta Q, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\Delta = \omega_{01} + \omega_{02} - \Omega_0 + \omega_1 - \omega_2$ - расстройка резонанса.

Используя (2.3), можно получить нелинейное дифференциальное уравнение, описывающее временную эволюцию плотности молекул $N(t)$, которое при $\Delta = 0$

можно представить в виде $\dot{N}^2 + W(N) = E$, где

$$W(N) = -4N(N_0 + n_{10} - N)(N_0 + n_{20} - N) \times \times (N_0 + f_{10} - N)(f_{20} - N_0 + N), \quad (2.4)$$

$E_0 = -4N_0 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20} \cos^2 \theta_0$. Здесь \dot{N}^2 , $W(N)$ и E_0 играют роль кинетической, потенциальной и полной энергий нелинейного осциллятора соответственно, колебания которого происходят в той области значений N , в которой $W(N) \leq E_0$. Используя (2.3), (2.4), формальное решение задачи можно представить в квадратурах в виде обобщённого эллиптического интеграла (гиперэллиптического интеграла)

$$\int_{N_0}^N \frac{dx}{\sqrt{P(x)}} = 2gt, \quad (2.5)$$

где под знаком квадратного корня содержится полином пятой степени

$$P(x) = N(N_0 + n_{10} - N)(N_0 + n_{20} - N)(N_0 + f_{10} - N)(f_{20} - N_0 + N) - \left(\frac{\Delta}{2g}(N - N_0) + \sqrt{N_0 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} \cos \theta_0\right)^2.$$

III. ОСНОВНЫЕ ВЫВООДЫ

Выразить интеграл (2.5) через известные функции не представляется возможным. поэтому дальнейший анализ можно провести, используя приближения заданной плотности частиц различного уровня либо численные методы. Используя численный метод решения интеграла (2.5) можно получить график зависимости нормированного периода от отношений начальных концентраций частиц N_0/f_{20} и n_{10}/n_{20} . На рис. 2 видно, что при отношении концентраций стремящемся к 1 период резко возрастает и обращается в бесконечность.

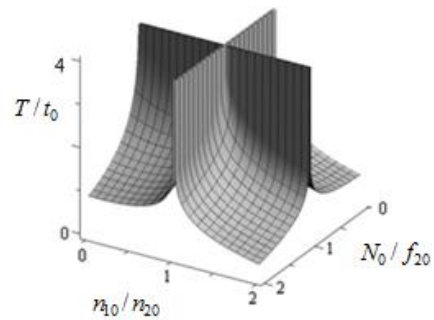


Рис.2 Зависимость периода T/t_0 колебаний плотности молекул от величин n_{10}/n_{20} и N_0/f_{20} .

Рассмотрим эволюцию системы в приближении заданных начальных плотностей фотонов обоих импульсов: $f_{10}, f_{20} \gg n_{10}, n_{20}, N_0$. Это приближение примечательно тем, что в качестве частиц заданной плотности, на много превосходящей плотности других частиц, взяты фотоны как входного, так и выходного каналов. Лимитирующим фактором в этом приближении является плотность атомов, точнее, наименьшая из двух начальных плотностей атомов n_{10} и n_{20} . Вид решения основного уравнения $\dot{N} = -gQ$ определяется соотношением между начальными плотностями атомов. При $n_{10} < n_{20}$ решение для функции $N(t)$ имеет вид

$$N = (N_0 + n_{10}) sn^2(g \sqrt{f_{10} f_{20} (N_0 + n_{20})} t \pm F(\varphi_0, k)), \quad (3.1)$$

где параметры k и φ_0 определяются выражениями $k^2 = (N_0 + n_{10}) / (N_0 + n_{20})$, $\varphi_0 = \arcsin \sqrt{N_0 / (N_0 + n_{10})}$. (3.2) Здесь $sn(x)$ - эллиптическая функция Якоби с модулем k , а $F(\varphi_0, k)$ - неполный эллиптический интеграл первого рода с модулем k . Амплитуда A и период колебаний T функции $N(t)$ определяются выражениями

$$A = N_0 + n_{10}, \quad T = 2K(k) / (g \sqrt{f_{10} f_{20} (N_0 + n_{20})}), \quad (3.3)$$

где $K(k)$ -полный эллиптический интеграл первого рода с модулем k .

При $n_{10} > n_{20}$ соответственно получаем

$$N = (N_0 + n_{20}) \operatorname{sn}^2(g\sqrt{f_{10}f_{20}(N_0 + n_{10})}t \pm F(\varphi_0, k)), \quad (3.4)$$

где

$$k^2 = (N_0 + n_{20}) / (N_0 + n_{10}), \quad \varphi_0 = \arcsin \sqrt{N_0 / (N_0 + n_{20})} \quad (3.5)$$

$$A = N_0 + n_{20}, \quad T = 2K(k) / (g\sqrt{f_{10}f_{20}(N_0 + n_{10})}). \quad (3.6)$$

Наконец, оба решения, (3.1) и (3.4), в пределе $n_{10} = n_{20} \equiv n_0$ совпадают и выражаются формулой

$$N = (N_0 + n_0) \operatorname{th}^2(g\sqrt{f_{10}f_{20}(N_0 + n_0)}t \pm \operatorname{arth} \sqrt{N_0 / (N_0 + n_0)}) \quad (3.7)$$

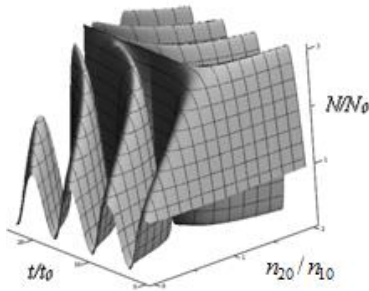


Рис. 3. Временная эволюция плотности молекул N/N_0 в зависимости от параметра n_{20}/n_{10} .

Отсюда видно, что при $n_{10} \neq n_{20}$ плотность молекул периодически изменяется в пределах от нуля до $N_0 + n_{10}$ при $n_{10} < n_{20}$ либо до $N_0 + n_{20}$ при $n_{20} < n_{10}$, тогда как при $n_{10} = n_{20}$ плотность молекул эволюционирует во времени аperiodически. Меньшая из начальных плотностей атомов определяет амплитуду колебаний плотности молекул. Решения со знаком (+) и (-) в аргументе эллиптической функции в (3.1) и (3.4) соответствуют колебаниям с одним и тем же периодом T , но смещёнными по фазе на величину $F(\varphi_0, k)$. При этом сдвиг по фазе полностью определяется начальными плотностями атомов и молекул.

На рис. 3 представлена временная эволюция плотности молекул (со знаком (+) в аргументе эллиптического синуса) в зависимости от отношения n_{20}/n_{10} . Видно, что при $n_{10} \neq n_{20}$ имеет место периодический режим превращения атомов в молекулы и обратно. С ростом отношения n_{20}/n_{10} (при фиксированном n_{10}) от нуля до единицы амплитуда колебаний плотности молекул монотонно (линейно) растёт от N_0 до $N_0 + n_{10}$, период колебаний также растёт и при $n_{20} = n_{10}$ периодический режим трансформируется в аperiodический. Далее, с ростом отношения n_{20}/n_{10} при $n_{20} > n_{10}$ амплитуда колебаний остаётся постоянной, равной $N_0 + n_{10}$, а

период колебаний убывает, т.е. аperiodическая эволюция при $n_{20}/n_{10} = 1$ трансформируется в периодическую при $n_{20}/n_{10} > 1$. Из рис. 3 также видно, что при стремлении параметра n_{20}/n_{10} к единице период колебаний быстро растёт и обращается в бесконечность при $n_{20} = n_{10}$.

На рис. 4 представлена зависимость периода колебаний плотности молекул от отношения n_{20}/n_{10} и начальной разности фаз θ_0 . Видно, что при изменении как одной переменной, так и другой, период изменяется, проходя через максимум. Если n_{20}/n_{10} и θ_0 одновременно достигают значений единица и $\pi/2$ соответственно, то максимум трансформируется в расходимость, что свидетельствует о переходе системы от периодического к аperiodическому режиму эволюции. Таким образом, сохраняя начальные плотности частиц постоянными и изменяя только начальную разность фаз θ_0 , можно управлять динамикой процесса атомно-молекулярной конверсии.

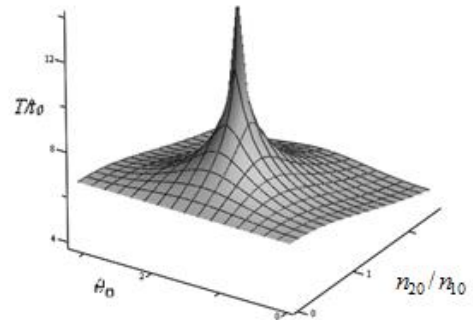


Рис. 4. Зависимость периода T/t_0 колебаний плотности молекул от параметров n_{20}/n_{10} и θ_0 .

IV. ВЫВОДЫ

Очевидно, что результаты исследования динамики стимулированной атомно-молекулярной конверсии в приближении заданной плотности фотонов второго импульса и плотности одного из двух сортов атомов ($f_{20}, n_{20} \gg N_0, f_{10}, n_{10}$ либо $f_{20}, n_{10} \gg N_0, f_{10}, n_{20}$) сводится к тем же результатам, что и в приближении заданных плотностей фотонов обоих импульсов с очевидной заменой везде $n_{20}(n_{10})$ на f_{10} и f_{10} на $n_{20}(n_{10})$, так как физически частицы во входном канале с плотностями n_{20}, n_{10}, f_{10} играют одинаковую роль. На представленных графиках видно, что возможен как периодический, так и аperiodический режим эволюции в зависимости от соотношения между параметрами.